

# REVISTA BRASILEIRA DE **ENERGIAS RENOVÁVEIS**



## **SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE PROCESSO ALTERNATIVO PARA REFINO DE ETANOL<sup>1</sup>**

GABRIEL M. K. PITOMBEIRA<sup>2</sup>, ELIAS DE S. MONTEIRO FILHO<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Apresentado no 1º Congresso de Pós-Graduação do IFSP: 29 de novembro a 02 de dezembro de 2016 - Matão-SP, Brasil

<sup>2</sup>Graduando em Engenharia Química, Instituto de Química de Araraquara, UNESP, gabriel.mkp@hotmail.com

<sup>3</sup>Professor Assistente, Instituto de Química de Araraquara, UNESP, elias@iq.unesp.br

**RESUMO:** O etanol combustível é um importante componente na matriz energética brasileira. Industrialmente é produzido por fermentação alcoólica do caldo de cana, seguindo-se destilação para obtenção do etanol hidratado (92,6 °GL) ou anidro (99 °GL). Neste trabalho, avalia-se a viabilidade de uso da extração líquido-líquido (ExLL) como operação adicional no refino do etanol. Como principais vantagens, destaca-se o baixo requerimento energético do processo e a possibilidade de remoção quase total do etanol da fase aquosa. A principal desvantagem é o acréscimo de um componente adicional, o que já ocorre no processo de destilação azeotrópica. Por meio de simulação computacional em software adequado, é possível comparar os requerimentos operacionais e energéticos dos processos original e alternativo sem a necessidade de testes laboratoriais ou escala-piloto, reduzindo os custos e riscos. Utilizando-se o software ChemSep, de distribuição gratuita, foi possível descrever ambos os processos em um computador desktop. O projeto encontra-se ainda em andamento, mas resultados parciais indicam a viabilidade operacional do processo alternativo.

**PALAVRAS-CHAVE:** extração líquido-líquido; produção de etanol; simulação computacional.

## **COMPUTER SIMULATION OF AN ALTERNATIVE ETHANOL REFINING PROCESS**

**ABSTRACT:** Fuel ethanol is an importante contributor to the brazilian energetic resources. It may be obtained industrially from fermented sugarcane juice by distillation, either ordinary or azeotropic. In this work, the viability of a supplementary liquid-liquid extraction operation aiming to recover dilute ethanol from the fermented medium is evaluated by computer simulation, sparing laboratorial or even pilot-scale tests. Liquid extraction is usually performed at (or near) room temperatures, also requiring no evaporation/condensation steps, thus being energetically much less intensive than distillation. On the other hand, a third component is introduced, that must be recovered at the end of the process. A computer simulation by means of the ChemSep software, freely available, has indicated that it is possible to perform this process.

**KEYWORDS:** liquid-liquid extraction; ethanol production; computer simulation.

### **INTRODUÇÃO**

O etanol combustível já está consolidado na matriz energética brasileira, sendo atualmente responsável por 5,1% de toda a energia ofertada no Brasil (BALANÇO ENERGÉTICO NACIONAL, 2015). Isto representa 34% do combustível consumido por veículos leves e 28,6 bilhões de litros produzidos (RESENHA ENERGÉTICA NACIONAL 2015).

O processo tradicional de obtenção do etanol, seja hidratado ou anidro, é a destilação. Trata-se de um processo bem conhecido e operado com altos índices de eficiência e baixas perdas. Entretanto, dado o volume de produção, qualquer alternativa capaz de fornecer um ganho na eficiência energética do processo certamente irá representar grande interesse para a indústria (SCHNEIDER et al., 2015).

RAHMAN et al. (2001) investigaram o equilíbrio líquido-líquido (ELL) de sistemas contendo água, etanol e um álcool com 4, 5 ou 6 carbonos, indicando boa aplicabilidade destes

ao processo de extração. OFFEMAN et al. (2005) sugeriram o emprego de monoálcoois de cadeia não muito longa (até 6 carbonos), ramificados e com hidroxilas secundárias ou terciárias. Entretanto, os próprios autores ressaltam o alto custo de aquisição destas substâncias, dado seu baixo volume de produção e uso restrito. Por outro lado, álcoois primários lineares de até 6 carbonos são também aplicáveis, com custo significativamente inferior.

A simulação computacional auxilia significativamente a pesquisa de processos químicos eficientes (ELISIARIO, 2013). O software ChemSep, de distribuição gratuita, representa corretamente diversos tipos de processo, sendo então empregado neste trabalho para estudar a ExLL como forma de esgotar o etanol de soluções aquosas diluídas. Os resultados indicam possível aplicação do processo alternativo, com vantagens operacionais na remoção do etanol da fase aquosa.

## MATERIAL E MÉTODOS

Este trabalho foi desenvolvido integralmente em software. A interface gráfica do ChemSep encontra-se ilustrada na Fig. 1. O software foi instalado em um computador tipo Notebook, com sistema operacional Windows<sup>®</sup> 7.

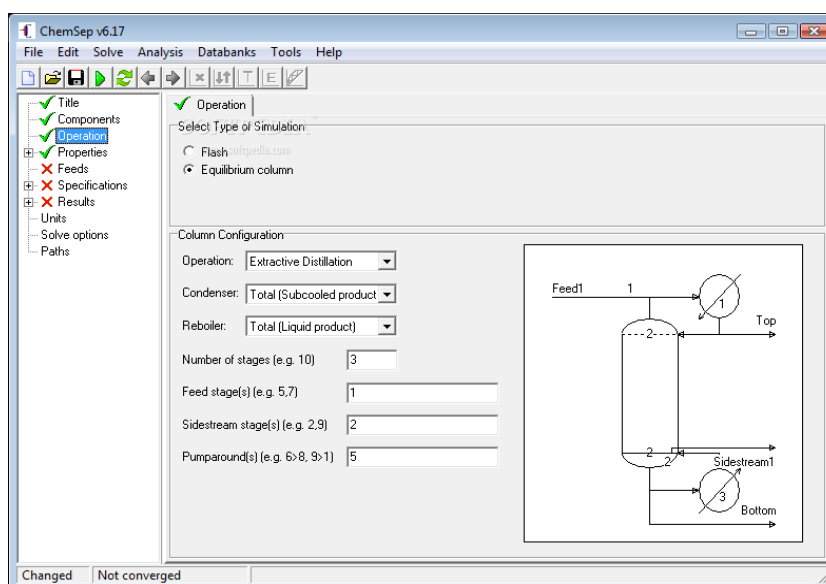


FIGURA 1. Interface gráfica do ChemSep.

Procedeu-se à configuração da simulação, que consiste nos seguintes passos:

1. Definição das substâncias (componentes) presentes na simulação. Aqui seguiu-se o trabalho de RAHMAN et al. (2001) e foi pesquisado o 1-butanol;
2. Definição da operação unitária desejada. Duas simulações foram avaliadas: extração em estágio único e extração em múltiplos estágios contracorrente;

3. Seleção dos modelos para cálculo das propriedades de transporte dos componentes presentes. O software sempre irá solicitar modelos para estimativa de diversas destas propriedades, como pressão de vapor, viscosidade, etc... Definiu-se a opção disponível no software de uso dos modelos padrão;
4. Especificação das composições das correntes de entrada. Como alimentação do extrator, definiu-se uma corrente contendo água e etanol, sendo a concentração molar deste último igual a 10%, que é o teor médio em vinhos destinados à destilaria, e uma corrente de solvente extrator puro. A temperatura de ambas as correntes, e por conseguinte a do extrator, foi fixada em 310 K, que é aproximadamente a temperatura do vinho após a fermentação;
5. Escolha dos modelos termodinâmicos necessários para representar adequadamente o processo. Como a operação ocorre com a presença de duas fases líquidas, optou-se pelo uso do modelo de contribuição de grupos UNIFAC (FREDENSLUND & PRAUSNITZ, 1975), com parâmetros de interação específicos para o ELL (MAGNUSSEN et al., 1981);
6. Por fim, especifica-se a pressão operacional da coluna, valor também desnecessário por se tratar de fases líquidas sem grandes variações de pressão, porém requerido pelo software. No caso, estabeleceu-se a pressão de 1 atmosfera ( $1,01 \cdot 10^5$  Pa).

Após estas etapas, o software verifica se há informações porventura faltantes e as indica. Sendo todas fornecidas, pode-se proceder à simulação.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente simulou-se um único estágio de extração. Os resultados obtidos pelo software estão resumidos na Tab. 1, com um exemplo ilustrado na Fig. 2.

**Tabela 1: Resultados da simulação de extração em estágio simples**

Corrente	Alimentação	Solvente	Extrato	Refinado
Frações Molares				
Etanol	0,1	0,0	0,069038	0,018573
Água	0,9	0,0	0,582412	0,956725
1-Butanol	0,0	0,5	0,348550	0,024702

Pode-se observar que o solvente butanol não apresentou boa capacidade extratora. Em vista disto, optou-se por modificar a operação, tentando-se um processo em 10 estágios. Os resultados estão na Tab. 2.

**Tabela 2: Resultados da simulação de extração em 10 estágios**

Corrente	Alimentação	Solvente	Extrato	Refinado
Frações Molares				
Etanol	0,1	0,0	0,069668	1,6317E-09
Água	0,9	0,0	0,582917	0,979498
1-Butanol	0,0	0,5	0,347415	0,020502

Nesta nova operação, verifica-se que a eficiência extrativa foi consideravelmente maior, obtendo-se uma corrente aquosa praticamente isenta de etanol, enquanto na operação em estágio simples a concentração final foi de aproximadamente 1,8% em mol. A perda de solvente no refinado foi semelhante em ambos os casos, com ligeira vantagem para o processo multi-estágios. Ambas as correntes de saída do extrator devem ser direcionadas a colunas de destilação, tornando a perda real do solvente irrisória.

## CONCLUSÕES

Por meio deste trabalho verificou-se a viabilidade de emprego da extração líquido-líquido no refino de etanol combustível. Os solventes testados podem ser adquiridos em quantidades necessárias a qualquer escala de processo. Comparando-se com uma planta usual, as modificações necessárias incluem a aquisição de uma coluna extratora e de uma coluna de destilação para a recuperação do solvente na fase aquosa, além de modificações nas colunas destinadas à destilação azeotrópica. Entretanto, este custo de aquisição pode ser compensado numa possível redução do custo operacional, devido à economia de energia promovida pela etapa de extração. A verificação desta assertiva será objeto de futuro desenvolvimento deste trabalho, bem como a avaliação do 1-pentanol e do 1-hexanol como solventes e minimização do uso de solvente.

## REFERÊNCIAS

ELISIARIO, A. C. M. *Simulação Computacional E Análise Paramétrica De Uma Unidade Industrial De Descarga E Estocagem De Amônia Líquida Pressurizada*. Dissertação (Mestrado), Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2013.

FREDENSLUND, A., JONES, R. L., PRAUSNITZ, J. M., Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients in Nonideal Liquid Mixtures, *AIChE J.*, 1975, v. 21, p. 1086.

KOOIJMAN, H. A., TAYLOR, R., ChemSep - Another Software System for the simulation of Separation Processes, *CACHE News*, No. 35, Fall 1992, p. 1-9.

MAGNUSSEN, T., RASMUSSEN, P., FREDENSLUND, A. UNIFAC parameter table for prediction of liquid-liquid equilibrium. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 1981, 20 (2), p. 331–339.

OFFEMAN, R. D., STEPHENSON, S. K., ROBERTSON, G. H., ORTS, W. J. Solvent extraction of ethanol from aqueous solutions. I. Screening methodology for solvents. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2005, n. 44, p. 6789-6796.

OFFEMAN, R. D., STEPHENSON, S. K., ROBERTSON, G. H., ORTS, W. J. Solvent extraction of ethanol from aqueous solutions. II. Linear, Branched, and Ring-Containing Alcohol Solvents. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2005, n. 44, p. 6797-6803.

RAHMAN, M. A., RAHMAN, M. S., NABI, M. N. Extraction of ethanol from aqueous solution by solvent extraction-liquid-liquid equilibrium of ethanol-water-1-butanol, ethanol-water-1-pentanol and ethanol-water-1-hexanol systems. *Indian Journal of Chemical Technology*, set. 2001, v. 8, p. 385-389.

SCHNEIDER, L. T., TELEKEN, J. G., BONASSA, G., OLIVEIRA, C. J., MEIER, T. R. W., BERTÉ, E. I., TELEKEN, J. T. Otimização do processo de destilação em planta piloto para produção de etanol hidratado. *Revista Brasileira de Energias Renováveis*, 2015, v.4, p. 105- 118.